



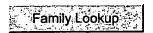




Include in patent order

# MicroPatent® Worldwide PatSearch: Record 1 of 1

[no drawing available]



## JP10316642 PHTHALONITRILE COMPOUND AND ITS PRODUCTION NIPPON SHOKUBAI CO LTD

Inventor(s): ;AOKI MINORU ;KAIEDA OSAMU Application No. 09129533, Filed 19970520, Published 19981202

## Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To obtain the subject new compound useful as an intermediate for a phthalocyanine compound containing a substituent group on a specific position on a phthalonitrile skeleton benzene nucleus.

SOLUTION: This compound is substituted with 1-2 phenoxy groups among four substitutable positions of a benzene nucleus of a phthalonitrile skeleton, in which the phenoxy groups are substituted with (substituted) aryl groups. such as 4-(2-phenyl-6-(2-propyl)phenoxy)3,5,6-trifluoronitrile. The highpurity compound is efficiently obtained in high yield by reacting 2-40 pts.wt., preferably 5-20 pts.wt. of a phenol compound substituted with a (substituted) aryl group with 1-2 mols, preferably 1.1-1.5 mols of a phthalonitrile compound substituted with at least one halogen atom based on 1 mol of the phenol compound in 100 pts.wt. of an organic solvent in the presence of a catalyst at 30-250°C, preferably 50-200°C.

Int'l Class: C07C25551 C07C25330 C07C25554 C09B04718

MicroPatent Reference Number: 000316446

COPYRIGHT: (C) 1998 JPO

PatentWeb | Home









For further information, please contact: Technical Support | Billing | Sales | General Information

## (19)日本国特許庁(JP)

## (12) 公開特許公報(A)

(11)特許出願公開番号

## 特開平10-316642

(43)公開日 平成10年(1998)12月2日

(51) Int.Cl. <sup>6</sup>		F I C 0 7 C 255/51				
		255/54		255/54		
// C 0 9 B 47/18		C 0 9 B 47/18				
		審査請求 未請求 請求項の数	6 OL (全 16 頁)			
(21)出顧番号	特願平9-129533	(71)出願人 000004628				
		株式会社日本触媒				
(22)出願日	平成9年(1997)5月20日	大阪府大阪市中央区沿	高麗橋4丁目1番1号			
		(72)発明者 青木 稔				
		茨城県つくば市観音・ 式会社日本触媒内	<b>分1丁目25番地12 株</b>			
		(72)発明者 海江田 修				
•		茨城県つくば市観音	<b>分1丁目25番地12 株</b>			
		式会社日本触媒内				
		(74)代理人 弁理士 八田 幹雄	(外1名)			

## (54) 【発明の名称】 フタロニトリル化合物およびその製造方法

## (57)【要約】

【課題】 光記録媒体として必要な溶解度、吸収波長、感度、反射率、耐光性、熱分解特性等の特性を発現し得るように分子設計された新規なフタロシアニン化合物を合成するために、その主原料として、こうした諸特性を有効に発現し得る1種ないし2種以上の置換基をフタロニトリル骨格のベンゼン核上の設計された位置に有してなる新規なフタロニトリル化合物を提供する。

【解決手段】 フタロニトリル骨格のベンゼン核の4個の置換可能な位置のうちの1~2個がフェノキシ基で置換されてなり、かつ該フェノキシ基が置換基を有していてもよいアリール基で置換されているフタロニトリル化合物。

#### 【特許請求の範囲】

【請求項1】 フタロニトリル骨格のベンゼン核の4個の置換可能な位置のうちの1~2個がフェノキシ基で置換されてなり、かつ該フェノキシ基が置換基を有していてもよいアリール基で置換されているフタロニトリル化合物。

【請求項2】 前記フェノキシ基のオルソ位の一方が前記アリール基で置換されており、少なくとも残位のオルソ位が下記(1)~(7)群の置換基

#### 【化1】

- (1)群 R<sup>1</sup>
- (2)群 CO<sub>2</sub>R<sup>2</sup>
- (8) 群  $CO_2(CH_2CH_2O)_aR^3$
- (4) 群 CO<sub>2</sub> (CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>b</sub>R<sup>4</sup>
- (5) 群 O[(CH<sub>2</sub>)<sub>c</sub>O]<sub>d</sub>R<sup>5</sup>
- (6) 群 CO<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>e</sub>R<sup>6</sup> (CH<sub>2</sub>)<sub>g</sub> (CH<sub>2</sub>)<sub>g</sub> (CH<sub>2</sub>)<sub>h</sub>

(上記一般式(1)中、X、YおよびZは水素原子またはフッ素原子を表し、X、YおよびZのうち少なくとも一つはフッ素原子であり、Wは置換基を有していてもよいアリール基を表し、Vは請求項2に規定した(1)~(7)群の置換基から選ばれる少なくとも一種の置換基を表し、またnは0~4の整数である。)で示される請求項1または2に記載のフタロニトリル化合物。

【請求項4】 一般式(1)において、Vがブロモ原子を含有するアルコキシカルボニル基である請求項3に記載のフタロニトリル化合物。

【請求項5】 一般式(1)において、Vは2級以上のアルキル基が直接カルボニル基に結合したアルコキシカルボニル基である請求項3に記載のフタロニトリル化合物。

【請求項6】 置換基を有していてもよいアリール基で 置換されているフェノール化合物と少なくとも一つのハロゲン原子で置換されているフタロニトリル化合物を反応させることを特徴とする請求項1~5のいずれか1項に記載のフタロニトリル化合物の製造方法。

### 【発明の詳細な説明】

## [0001]

【発明の属する技術分野】本発明は、新規なフタロニト リル化合物およびその製造方法に関するものである。詳 しくは、医薬、農薬、各種工業薬品の中間体として有用

(ただし、上記(1)~(7)群の置換基の式中、R1 はハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素原子数 1~20個の直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基また は置換基を有していてもよいアリール基を表わし、 R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup> およびR<sup>5</sup> は各々独立に置換基を有し ていてもよい炭素原子数1~20個の直鎖、分岐鎖また は環状のアルキル基または置換基を有していてもよいア リール基を表わし、R6・は置換基を有していてもよいア リール基を表わし、AはCH基または窒素原子を表わ し、Bは酸素原子、硫黄原子、CH。基、NH基または 炭素原子数1~4個のアルキルアミノ基を表わし、a、 b、cおよびeは1~5の整数であり、dおよびfは0 ~6の整数であり、gおよびhは各々独立に1~4の整 数である。)から選ばれる少なくとも1種の置換基で置 換されてなる請求項1に記載のフタロニトリル化合物。 【請求項3】 一般式(1)

【請求項3】 一般式(1) 【化2】

(1)

であり、例えば、オプトエレクトロニクス材料として用 いられるフタロシアニン化合物の原料として極めて有用 なフタロニトリル化合物およびその製造方法に関するも のである。より詳しくは、600~1000 nmの近赤 外域に吸収を有し溶解性に優れており、半導体レーザー を使う光記録媒体、液晶表示装置、光学文字読取機など における書き込みあるいは読み取りのための近赤外吸収 色素、近赤外増感剤、感熱転写、感熱紙・感熱孔版など の光熱変換剤、近赤外線吸収フィルター、眼性疲労防止 剤、光導電材料などとして用いる近赤外線吸収材料とし て、あるいは、撮像管に用いる色分解フィルター、液晶 表示用カラーフィルター、カラーブラウン管選択吸収フ ィルター、カラートナー、インクジェット用インク、改 ざん偽造防止用バーコード用インク、さらに微生物不活 性化剤、腫瘍治療用感光性色素などに用いる際に優れた 効果を発揮するフタロシアニン化合物、特にコンパクト ディスク対応の追記型光記録媒体に用いるための近赤外 吸収色素として非常に優れた効果を発揮するフタロシア ニン化合物の中間体として極めて有用なフタロニトリル 化合物およびその製造方法に関するものである。

## [0002]

【従来の技術】近年、半導体レーザーを光源として用いるコンパクトディスク、レーザーディスク、光メモリー ディスク、光カードなどの光記録媒体の開発が活発であ

る。特に、CD、PHOTO-CDあるいはCD-RO Mは、大容量、高速アクセスのデジタル記録媒体として 音声、画像、コードデータなどの保存再生に、大量に利 用されている。これらのシステムはいずれも半導体レー ザーに感受するいわゆる近赤外吸収色素を必要とし、そ れらの色素に関して(1)薄膜での極大吸収波長が70 0~730nmに制御されていること(会合によるピー クが少なく、そのことにより吸光度が高く、ピークがシ ャープであることによって、反射率などの光学特性に対 する主要な構成要因となる)、(2)スピンコートなど の簡便でかつ生産性に優れた方法で基板上に塗布でき、 かつ基板を侵さない溶媒に対しての溶解性に優れている こと、(3)耐熱性、耐光性が良好であること、(4) 熱分解特性が良好であること(感度に対する主要な構成 要因となる)、(5)製造方法などにおいて経済性に優 れていることなど要求される特性の良好な化合物が求め られている。なかでも光、熱、温度などに対して安定で あり堅牢性に優れているフタロシアニン化合物について は、数多く検討されている。

【0003】例えば、特開昭58-56892号には、ペルフルオロフタロシアニン化合物を用いる方法が提案されている。また、特開昭61-192780号、特開昭61-246091号、特開昭63-37991号、特開昭64-42283号、特開平2-276677号、特開平2-91360号、特開平2-265788号、特開平3-215466号、特開平4-226390号などには、フタロシアニン骨格のベンゼン環に酸素を介して置換基を導入してなるものが提案されている。さらに、特開平5-1272号などにはフタロシアニンのα位にアルコキシ基を4個導入し、残基にハロゲン化合物などを一部導入したものが提案されている。

【0004】しかしながら、これらの化合物は、フタロシアニン骨格のベンゼン核上の置換基の種類、数および位置によっては耐光性が悪かったり、反射率が小さかったり、通常よく用いられているポリカーボネートなどの基板に直接塗布できる溶剤に溶解しなかったり、あるいは吸収波長の制御において難点があったりするなどの問題点を有している。また、α位に置換基を導入したものは、原料とするフタロニトリルからの生産性が悪いなど、経済性の点で問題点を有している。

【0005】また、本出願人らは、これまでに嵩高い置換基をもつフェノキシ基が $\beta$ 位に置換されたフタロシアニン化合物を提案してきた(特開平5-345861、特開平6-107663、特開平6-328856、特開平8-225751号)。

【0006】しかしながら、これらの化合物も光記録媒体において反射率、感度などに問題点を有しており、これまでに提案されているフタロシアニン化合物は、上記特性をすべて満足するものではない。

【0007】一方、上記特性を満足するような新規なフ

タロシアニン化合物を設計・開発するためには、フタロ シアニン骨格のベンゼン核上に導入する置換基の種類、 数および位置を特定する必要がある。そのためには、無 置換フタロシアニン化合物などのフタロシアニン骨格の ベンゼン核上の設計された位置に直接所望の置換基を導 入することも可能であるが、所望の置換基を直接導入す る方法がとれない場合も多く、新規なフタロシアニン化 合物の設計では、まずフタロニトリル骨格のベンゼン核 上の設計された位置に所望の置換基を導入してなるフタ ロニトリル化合物を別途合成し、ついで該フタロニトリ ル化合物を合成することにより所望の新規なフタロシア ニン化合物を得る手法がとられている。当該手法におい ては、分子設計されたフタロシアニン化合物の主原料と なる新規なフタロニトリル化合物およびその製造方法の 開発に重点がおかれている。すなわち、フタロニトリル 化合物を合成する段階でフタロニトリル骨格のベンゼン 核上の設計された位置に所望の置換基を導入し、新規な フタロニトリル化合物を得ることが主要な技術課題とな っている。

#### [0008]

【発明が解決しようとする課題】本発明は、従来技術の有する前記事情に考慮してなされたものである。すなわち、本発明の目的は、600~1000nmの吸収波長域において目的に応じた吸収制御が可能であり、優れた溶解性、耐熱性、耐光性等を発現し得るように分子設計された新規なフタロシアニン化合物、特に光記録媒体、なかでもコンパクトディスク対応の光記録媒体として用いるにあたって、それらに必要な溶解度、吸収波長、感度、反射率、耐光性、熱分解特性等の諸特性を発現し得るように分子設計された新規なフタロシアニン化合物を合成するために、その主原料として、こうした諸特性を有効に発現し得る1種ないし2種以上の置換基をフタロニトリル骨格のベンゼン核上の設計された位置に有してなる新規なフタロニトリル化合物を提供することにある。

【0009】また、本発明の他の目的は、上記フタロニトリル化合物を、効率よく、しかも高純度で製造する方法を提供することにある。

#### [0010]

【課題を解決するための手段】上記諸目的は、(1)フタロニトリル骨格のベンゼン核の4個の置換可能な位置のうちの1~2個がフェノキシ基で置換されてなり、かつ該フェノキシ基が置換基を有していてもよいアリール基で置換されているフタロニトリル化合物により達成される。

【0011】また、本発明の他の目的は、(2) 前記フェノキシ基のオルソ位の一方が前記アリール基で置換されており、少なくとも残位のオルソ位が下記(1)~(7)群の置換基

[0012]

【化3】

(1) 群 R<sup>1</sup>

(2)群 CO<sub>2</sub>R<sup>2</sup>

(3) 群 CO<sub>2</sub> (CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>a</sub>R<sup>3</sup>

(4) 群  $CO_2$  ( $CH_2CH_2CH_2O$ )<sub>b</sub> $R^4$ 

(5) 群 O[(CH<sub>2</sub>)<sub>c</sub>O]<sub>d</sub>R<sup>5</sup>

【0013】(ただし、上記(1) $\sim$ (7)群の置換基の式中、 $R^1$ はハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素原子数 $1\sim20$ 個の直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基または置換基を有していてもよいアリール基を

【0016】(上記一般式(1)中、X、YおよびZは水素原子またはフッ素原子を表し、X、YおよびZのうち少なくとも一つはフッ素原子であり、Wは置換基を有していてもよいアリール基を表し、Vは上記(2)に規定した(1)~(7)群の置換基から選ばれる少なくとも一種の置換基を表し、またnは0~4の整数である。)で示される上記(1)または(2)に記載のフタロニトリル化合物によっても達成される。

【0017】さらに、本発明の他の目的は、(4) 一般式(1)において、Vがブロモ原子を含有するアルコキシカルボニル基である上記(3)に記載のフタロニトリル化合物によっても達成される。

【0018】さらに、本発明の他の目的は、(5) 一般式(1)において、Vは2級以上のアルキル基が直接カルボニル基に結合したアルコキシカルボニル基である上記(3)に記載のフタロニトリル化合物によっても達成される。

【0019】さらに、本発明の他の目的は、(6) 置換基を有していてもよいアリール基で置換されているフェノール化合物と少なくとも一つのハロゲン原子で置換されているフタロニトリル化合物を反応させることを特徴とする上記(1)~(5)のいずれか1つに記載のフタロニトリル化合物の製造方法によっても達成される。【0020】

【発明の実施の形態】本発明に係るフタロニトリル化合物は、フタロニトリル骨格のベンゼン核の4個の置換可能な位置のうちの1~2個がフェノキシ基で置換されてなり、かつ該フェノキシ基が置換基を有していてもよいアリール基で置換されているものである。

表わし、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$  および $R^5$  は各々独立に置換基を有していてもよい炭素原子数 $1\sim20$ 個の直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基または置換基を有していてもよいアリール基を表わし、 $R^6$  は置換基を有していてもよいアリール基を表わし、AはCH基または窒素原子を表わし、Bは酸素原子、硫黄原子、 $CH_2$  基、NH基または炭素原子数 $1\sim4$  個のアルキルアミノ基を表わし、a、b、cおよびeは $1\sim5$ の整数であり、dおよびfは $0\sim6$ の整数であり、gおよびhは各々独立に1~4の整数である。)から選ばれる少なくとも1種の置換基で置換されてなる上記(1)に記載のフタロニトリル化合物によっても達成される。

【0014】さらに、本発明の他の目的は、(3) ー 般式(1)

[0015]

【化4】

(1)

【0021】上記フェノキシ基で置換されたフタロニト リル化合物において、置換基を有していてもよいアリー ル基としては、フェニル基、ナフチル基などを挙げるこ とができる。好ましくはフェニル基である。アリール基 に場合によっては存在する置換基は、例えば、ハロゲン 原子、アルキル基、アルコキシ基、ハロゲン化アルキル 基、ハロゲン化アルコキシ基、ニトロ基、アミノ基、ア ルキルアミノ基、アルコキシカルボニル基などである。 【0022】また、上記フェノキシ基で置換されたフタ ロニトリル化合物は、さらにフェノキシ基以外の置換基 で、その残基の一部または全部が置換されていてもよ い。すなわち、上記フェノキシ基で置換されたフタロニ トリル化合物という場合、フェノキシ基のみで置換され たフタロニトリル化合物の1種に限定されるのでなく、 このほかにも、上述のフェノキシ基で置換され、さらに フェノキシ基以外の置換基で、その残基の一部または全 部が置換されたフタロニトリル化合物であってもよい。 【0023】このようなフェノキシ基で置換されたフタ ロニトリル化合物における上記フェノキシ基以外の置換 基としては、例えば、ハロゲン原子、アルキル基、アリ ール基、ヘテロ環基、シアノ基、ヒドロキシ基、ニトロ 基、アミノ基(置換アミノ基を含む)、アルコキシ基、 アシルアミノ基、アミノカルボニルアミノ基、スルファ モイルアミノ基、アルキルチオ基、アリールチオ基、ア ルコシキカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、カ ルバモイル基、スルファモイル基、スルホニル基、アル コキシカルボニル基、ヘテロ環オキシ基、アゾ基、アシ ルオキシ基、カルバモイルオキシ基、シリルオキシ基、 アリールオキシカルボニル基、イミド基、ヘテロ環チオ

基、スルフィニル基、ホスホリル基、アシル基などが挙 げられる。置換基の種類は1種類でも2種類以上でも構 わない。好ましい置換基としてはハロゲン原子、特に塩 素原子、フッ素原子であり、特にフッ素原子である。

【0024】本発明の新規フタロニトリル化合物のうち好ましいものが、上記一般式(1)で表されるものであり、以下これにつき詳述する。

【0025】一般式(1)において、Wで表されるフェノキシ基上の置換基は、置換基を有していてもよいアリール基を表す。該アリール基の例としては、フェニル基、ナフチル基などを挙げることができる。好ましくはフェニル基である。アリール基に場合によっては存在する置換基は、例えば、ハロゲン原子、アルキル基、アルコキシ基、ハロゲン化アルキル基、ハロゲン化アルコキシ基、ニトロ基、アミノ基、アルキルアミノ基、アルコキシカルボニル基などである。

【0026】ここで、ハロゲン原子とは、フッ素、塩素、臭素およびヨウ素であり、この中で好ましくは臭素である。

【0027】アルキル基とは、炭素数1~20の直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基であり、好ましくは炭素数1~8のアルキル基である。具体的には、メチル基、エチル基、n-プロピル基、イソプロピル基、n-ブチル基、tert-ブチル基、n-ペンチル基、n-ヘキシル基、シクロヘキシル基、n-オクチル基、2-エチルヘキシル基、n-デシル基、ラウリル基、ステアリル基などを示す。

【0028】アルコキシ基とは、炭素数1~20の直鎖、分岐鎖または環状のアルコキシ基であり、好ましくは炭素数1~8のアルコキシ基である。具体的には、メトキシ基、エトキシ基、nープロピルオキシ基、イソプロピルオキシ基、nーブトキシ基、tertーブトキシ基、nーペンチルオキシ基、nーヘキシルオキシ基、シクロヘキシルオキシ基、nーオクチルオキシ基、2-エチルヘキシルオキシ基、nーデシルオキシ基などを示す。

【0029】ハロゲン化アルキル基とは、炭素数1~20の直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基の一部がハロゲン化されたものであり、好ましくは炭素数1~8個のアルキル基の一部がバロゲン化されたものである。特に好ましくは炭素数1~8個のアルキル基の一部がブロモ化されたものである。具体的には、ブロモメチル基、ブロモエチル基、ブロモプロピル基、ブロモベンチル基、ブロモヘプチル基、ブロモオクチル基などのモノブロモアルキル基、1、3ージブロモプロピル基、1、3ージブロモブチル

【0030】ハロゲン化アルコキシ基とは、炭素数1~20の直鎖、分岐鎖または環状のアルコキシ基の一部がハロゲン化されたものであり、好ましくは炭素数1~8

基などのジブロモアルキル基などを示す。

個のアルコキシ基の一部がハロゲン化されたものである。特に好ましくは炭素数1~8個のアルコキシ基の一部がプロモ化されたものである。具体的には、プロモメトキシ基、プロモエトキシ基、プロモプロボキシ基、プロモベントキシ基、プロモヘキシルオキシ基、プロモヘアチルオキシ基をどのモノブロモアルコキシ基、1,3ージブロモアルコキシ基などのジブロモアルコキシ基などを示す。

【0031】アルコキシカルボニル基とは、アルコキシ 基のアルキル基部分にヘテロ原子を含んでもよい炭素数 1~8、好ましくは1~5のアルコキシカルボニル、ま たはヘテロ原子を含んでもよい炭素数3~8、好ましく は5~8の環状アルコキシカルボニルを示す。具体的に は、メトキシカルボニル基、エトキシカルボニル基、n ープトキシカルボニル基、tert-ブトキシカルボニ ル基、n-ペンチルオキシカルボニル基、n-ヘキシル オキシカルボニル基、2-エチルヘキシルオキシカルボ ニル基、メトキシエトキシカルボニル基、エトキシエト キシカルボニル基、ブトキシエトキシカルボニル基、ジ エチルアミノエトキシカルボニル基、メチルチオエトキ シカルボニル基、メトキシプロピルオキシカルボニル 基、(3,6,9-オキサ)デシルオキシカルボニル 基、テトラヒドロフルフリルオキシカルボニル基、ピラ ンオキシカルボニル基、ピペリジノオキシカルボニル 基、ピペリジノエトキシカルボニル基、テトラヒドロピ ロールオキシカルボニル基、テトラヒドロピランメトキ シカルボニル基、テトラヒドロチオフェンオキシカルボ ニル基、シクロヘキシルオキシカルボニル基などを示 す。

【0032】また、上記一般式(1)において、Wのフェノキシ基上での置換位置は特に限定されないが、フェノキシ基のオルソ位にあることがより好ましい。置換基を有していてもよいアリール基がフェノキシ基のオルソ位にあることによって、当該フタロニトリル化合物を原料に用いて合成したフタロシアニン化合物の薄膜の吸収スペクトルにおける会合体由来の吸収ピーク(以下、会合ピークともいう。)を大きく抑制できる。

【0033】また、上記一般式(1)において、Vで表されるフェノキシ基上の置換基は、下記(1)~(7) 群の置換基

【0034】 【化5】

- (1) 群 R<sup>1</sup>
- (2)群 CO<sub>2</sub>R<sup>2</sup>
- (3)群 CO<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>a</sub>R<sup>3</sup>
- (4) 群 CO<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O)<sub>b</sub>R<sup>4</sup>
- (5) 群 O[(CH<sub>2</sub>)<sub>c</sub>O]<sub>d</sub>R<sup>5</sup>
- (6) 群 CO<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>e</sub>R<sup>6</sup> (CH<sub>2</sub>)<sub>g</sub> (CH<sub>2</sub>)<sub>b</sub> B

【0035】(ただし、上記(1)~(7)群の置換基の式中、 $R^1$  はハロゲン原子、置換基を有していてもよい炭素原子数1~20個の直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基または置換基を有していてもよいアリール基を表わし、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^6$  および $R^5$  は各々独立に置換基を有していてもよい炭素原子数1~20個の直鎖、分岐鎖または環状のアルキル基または置換基を有していてもよいアリール基を表わし、 $R^6$  は置換基を有していてもよいアリール基を表わし、 $R^6$  は置換基を有していてもよいアリール基を表わし、 $R^6$  は置換基を有していてもよいアリール基を表わし、 $R^6$  は置換基を有していてもよいアリール基を表わし、 $R^6$  は置換基を有していてもよいアリール基を表わし、 $R^6$  は間換基を表し、 $R^6$  は間換基を表わし、 $R^6$  は間換基を表わし、 $R^6$  は間換基を表わし、 $R^6$  は間換基を表す。

【0036】これら(1)~(7)群の置換基の具体例としては、例えば、下記の置換基群が挙げられる。

【0037】(1)群:フッ素、塩素、臭素、ヨウ素、 メチル、エチル、プロピル、イソプロピル、シクロプロ ピル、ブチル、イソブチル、sec‐ブチル、tert ーブチル、直鎖あるいは分岐したペンチル、直鎖あるい は分岐したヘキシル、シクロヘキシル、直鎖あるいは分 岐したヘプチル、直鎖あるいは分岐したオクチル、直鎖 あるいは分岐したノニル、直鎖あるいは分岐したデシ ル、直鎖あるいは分岐したウンデシル、直鎖あるいは分 岐したドデシル、ブロモメチル、ジブロモメチル、トリ ブロモメチル、1ーブロモエチル、2ープロモエチル、 1, 2-ジブロモエチル、1, 1-ジブロモエチル、 2, 2-ジプロモエチル、1, 1, 2-トリプロモエチ ル、1,2,2-トリプロモエチル、1-ブロモプロピ ル、2-ブロモ-1-プロピル、3-ブロモ-1-プロ ピル、1ーブロモー2ープロピル、2、3ージブロモー 1プロピル、1、3ージプロモー2ープロピル、4ープ ロモー1ーブチル、1ーブロモー1ーブチル、1ーブロ モー2ーブチル、2ープロモー1ーブチル、1,4ージ ブロモー2ーブチル、5ーブロモー1ーペンチル、1~ ブロモー1ーペンチル、6ーブロモー1ーヘキシル、1 ープロモー1ーヘキシル、7ープロモー1ーヘプチル、 1ープロモー1ーヘプチル、8ープロモー1ーオクチ

ル、1-ブロモー1-オクチル、9-ブロモー1-ノニ ル、1-ブロモー1-ノニル、10-ブロモー1-デシ ル、1-ブロモ-1-デシル、11-ブロモ-1-ウン デシル、1ープロモー1ーウンデシル、12ープロモー 1ードデシル、1ーブロモー1ードデシル、フェニル、 oーメチルフェニル、mーメチルフェニル、pーメチル フェニル、oーエチルフェニル、mーエチルフェニル、 pーエチルフェニル、oープロピルフェニル、mープロ ピルフェニル、pープロピルフェニル、oーイソプロピ ルフェニル、mーイソプロピルフェニル、pーイソプロ ピルフェニル、oーブチルフェニル、mーブチルフェニ ル、pープチルフェニル、o-tertープチルフェニ ル、m-tert-ブチルフェニル、p-tert-ブ チルフェニル、o-メトキシフェニル、m-メトキシフ ェニル、pーメトキシフェニル、o-エトキシフェニ ル、m-エトキシフェニル、p-エトキシフェニル、o ープロポキシフェニル、mープロポキシフェニル、pー プロポキシフェニル、oーイソプロポキシフェニル、m ーイソプロポキシフェニル、pーイソプロポキシフェニ ル、o-ブトキシフェニル、m-ブトキシフェニル、p ープトキシフェニル、2,6ージメチルフェニル、2, 6ジエチルフェニル、2,6-ジプロピルフェニル、 2,6-ジイソプロピルフェニル、2,6-ジプチルフ ェニル、2, 6-ジtert-ブチルフェニル、2, 6ージメトキシフエニル、2,6ージエトキシフェニル、 2,6-ジプロポキシフェニル、2,6-ジイソプロポ キシフェニル、2,6ージブトキシフェニル、2-フル オロフェニル、2ークロロフェニル、2ープロモフェニ ル、2-ヨードフェニル、3-フルオロフェニル、3-クロロフェニル、3ープロモフェニル、3ーヨードフェ ニル、4-フルオロフェニル、4-クロロフェニル、4 ープロモフェニル、4ーヨードフェニル、2、3ージフ ルオロフェニル、2,3-ジクロロフェニル、2,4-ジフルオロフェニル、2,4-ジクロロフェニル、2, 4-ジブロモフェニル、2,5-ジフルオロフェニル、 2, 5-ジクロロフェニル、2, 6-ジフルオロフェニ ル、2,6-ジクロロフェニル、2,6-ジブロモフェ ニル、3,4ージフルオロフェニル、3,4ージクロロ フェニル、3,5ージフルオロフェニル、3,5ージク ロロフェニル、2,3,4-トリフルオロフェニル、 2, 3, 4ートリクロロフェニル、2, 3, 5ートリフ ルオロフェニル、2、3、5ートリクロロフェニル、 2, 3, 6-トリフルオロフェニル、2, 3, 6-トリ クロロフェニル、2、4、6-トリフルオロフェニル、 2, 4, 6-トリクロロフェニル、2, 4, 6-トリブ ロモフェニル、2,4,6-トリヨードフェニル、2, 3, 5, 6ーテトラフルオロフェニル、ペンダフルオロ フェニル、ペンタクロロフェニル。 【0038】(2)群:メトキシカルボニル、エトキシ

カルボニル、プロポキシカルボニル、イソプロポキシカ

ルボニル、ブトキシカルボニル、イソブトキシカルボニ ル、sec-ブトキシカルボニル、tert-ブトキシ カルボニル、直鎖あるいは分岐したペンチルオキシカル ボニル、直鎖あるいは分岐したヘキシルオキシカルボニ ル、シクロヘキシルオキシカルボニル、直鎖あるいは分 岐したヘプチルオキシカルボニル、直鎖あるいは分岐し たオクチルオキシカルボニル、直鎖あるいは分岐したノ ニルオキシカルボニル、直鎖あるいは分岐したデシルオ キシカルボニル、直鎖あるいは分岐したウンデシルオキ シカルボニル、直鎖あるいは分岐したドデシルオキシカ ルボニル、シクロヘキサンメトキシカルボニル、シクロ ヘキサンエトキシカルボニル、3-シクロヘキシル-1 ープロポキシカルボニル、tert-ブチルシクロヘキ シルオキシカルボニル、ブロモメトキシカルボニル、2 ーブロモエトキシカルボニル、3ーブロモー1ープロボ キシカルボニル、2ープロモー1ープロポキシカルボニ ル、1-ブロモー2-プロポキシカルボニル、2,3-ジブロモー1ープロポキシカルボニル、1,3ージブロ モー2ープロポキシカルボニル、1ーブロモー2ーブト キシカルボニル、2-ブロモ-1-ブトキシカルボニ ル、4-ブロモ-1-ブトキシカルボニル、1,4-ジ ブロモー2ープトキシカルボニル、5ーブロモー1ーペ ンチルオキシカルボニル、6-ブロモ-1-ヘキシルオ キシカルボニル、7ープロモー1ーヘプチルオキシカル ボニル、8-ブロモ-1-オクチルオキシカルボニル、 9ープロモー1ーノニルオキシカルボニル、10ープロ モー1ーデシルオキシカルボニル、11ーブロモー1ー ウンデシルオキシカルボニル、12-ブロモ-1-ドデ シルオキシカルボニル、フェノキシカルボニル、4-メ チルフェノキシカルボニル、4-クロロフェノキシカル ボニル、4-シクロヘキシルフェノキシカルボニル、4 -フェニルフェノキシカルボニル、2-フルオロフェノ キシカルボニル、4-エトキシフェノキシカルボニル。 【0039】(3)群:メトキシエトキシカルボニル。 エトキシエトキシカルボニル、3′,6′ーオキサヘプ チルオキシカルボニル、3′,6′-オキサオクチルオ キシカルボニル、3′,6′,9′-オキサデシルオキ シカルボニル、3′,6′,9′,12′-オキサトリ デシルオキジカルボニル。

【0040】(4)群:メトキシプロピルオキシカルボニル、エトキシプロピルオキシカルボニル、4′,8′ーオキサノニルオキシカルボニル、4′,8′ーオキサデシルオキシカルボニル、4′,8′,12′ーオキサトリデシルオキシカルボニル。

【0041】(5)群:メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ、ブトキシ、イソブトキシ、secーブトキシ、tertーブトキシ、直鎖あるいは分岐したペンチルオキシ、直鎖あるいは分岐したペナシルオキシ、立クロペキシルオキシ、直鎖あるいは分岐したペプチルオキシ、直鎖あるいは分岐したオクチルオキシ、直

鎖あるいは分岐したノニルオキシ、直鎖あるいは分岐し たデシルオキシ、直鎖あるいは分岐したウンデシルオキ シ、直鎖あるいは分岐したドデシルオキシ、ブロモメト キシ、ジブロモメトキシ、トリブロモメトキシ、1ーブ ロモエトキシ、2~ブロモエトキシ、1,2~ジブロモ エトキシ、1,1-ジブロモエトキシ、2,2-ジブロ モエトキシ、1,1,2-トリブロモエトキシ、1, 2,2-トリブロモエトキシ、1-ブロモプロポキシ、 2-ブロモー1-プロポキシ、3-ブロモー1-プロポ キシ、1ーブロモー2ープロポキシ、2,3ージブロモ -1-プロポキシ、1,3-ジブロモ-2-プロポキ シ、4-ブロモ-1-ブトキシ、1-ブロモ-1-ブト キシ、1-ブロモ-2-ブトキシ、2-ブロモ-1-ブ トキシ、1,4-ジブロモ-2-ブトキシ、5-ブロモ -1-ペンチルオキシ、1-プロモ-1-ペンチルオキ シ、6-ブロモ-1-ヘキシルオキシ、1-ブロモ-1 ーヘキシルオキシ、7ーブロモー1ーヘプチルオキシ、 1-ブロモ-1-ヘプチルオキシ、8-ブロモ-1-オ クチルオキシ、1ーブロモー1ーオクチルオキシ、9ー ブロモー1ーノニルオキシ、1ーブロモー1ーノニルオ キシ、10-ブロモ-1-デシルオキシ、1-ブロモ-1ーデシルオキシ、11ーブロモー1ーウンデシルオキ シ、1-ブロモ-1-ウンデシルオキシ、12-ブロモ -1-ドデシルオキシ、1-ブロモ-1-ドデシルオキ シ、ブロモメトキシエトキシ、1-ブロモエトキシエト キシ、1ープロモー3′,6′ーオキサヘプチルオキ シ、1-プロモ-3′,6′-オキサオクチルオキシ、 1-ブロモー3′,6′,9′-オキサデシルオキシ、 1-ブロモー3′,6′,9′,12′-オキサトリデ シルオキシ、ブロモメトキシプロポキシ、1-ブロモエ トキシプロポキシ、1ーブロモー4′,8′ーオキサノ ニルオキシ、1ープロモー4′,8′ーオキサデシルオ キシ、メトキシエトキシ、エトキシエトキシ、3′, 6′-オキサヘプチルオキシ、3′,6′-オキサオク チルオキシ、3´,6´,9´-オキサデシルオキシ、 3', 6', 9', 12'-オキサトリデシルオキシ、 メトキシプロピルオキシ、エトキシプロピルオキシ、 4′,8′-オキサノニルオキシ、4′,8′-オキサ デシルオキシ。

【0042】(6) 群:ベンジルオキシカルボニル、フェネチルオキシカルボニル、3-フェル-1-プロボキシカルボニル、4-フェニル-1-ブトキシカルボニル、5-フェニル-1-ペントキシカルボニル、6-フェニル-1-ヘキシルオキシカルボニル。

【0043】(7)群:2ーテトラヒドロキシフランオキシカルボニル、4ーテトラヒドロピラノオキシカルボニル、2ーピロリジノオキシカルボニル、2ーピペリジノオキシカルボニル、2ーテトラヒドロテオフェンオキシカルボニル、テトラヒドロフルフリルオキシカルボニル、4ーテトラヒドロピラノオキシカルボニル、2ーモ

ルフォリノエトキシカルボニル、2-ピロリジノエトキ シカルボニル、2-ピペラジノエトキシカルボニル。

【0044】上記(1)~(7)群の置換基のうちで、

(2) 群であることが好ましく、イソプロポキシカルボ ニル、tertーブトキシカルボニルなどの2級以上の アルキル基が直接カルボニル基に結合したアルコキシカ ルボニル基がより好ましい。更に好ましくは、3-ヘキ サノキシカルボニル、6-ウンデカノキシカルボニル、 4-ジメチル-3-ペントキシカルボニル、2,6 ージメチルー4ーヘプトキシカルボニルなどの炭素数が 6以上でかつ2級以上のアルキル基が直接カルボニル基 に結合したアルコキシカルボニル基がより好ましい。一 方で好ましい置換基として、ブロモ原子を含有するアル コキシカルボニル基があり、特に、1-ブロモー2-プ ロポキシカルボニル。1.3-ジブロモ-2-プロポキ シカルボニル等の臭素化された2級以上のアルキル基を 持つアルコキシカルボニル基がより望ましい。2級以上 のアルキル基が直接カルボニル基に結合したアルコキシ カルボニル基、さらには臭素化された2級以上のアルキ ル基を持つアルコキシカルボニル基が置換基であるもの は、反射率および記録感度などの光学特性、特に記録感 度に優れた光記録媒体となり得る新規なフタロシアニン 化合物の原料となるフタロニトリル化合物を設計通りに 合成することができる点から好ましい。

【0045】また、上記一般式(1)において、置換基 Vのフェノキシ基上での置換位置は特に限定されるもの ではないが、フェノキシ基のオルソ位にあることが好ま しく、特に置換基V、Wともにフェノキシ基のオルソ 位、すなわち2,6位にあることが好ましい。置換基 V、Wがフェノキシ基の2,6位にあることによって、 当該フタロニトリル化合物を用いて合成したフタロシア ニン化合物の吸収ピークをよりシャープにできる。さら には、当該フタロニトリル化合物を用いて合成したフタ ロシアニン化合物では、その薄膜の会合ピークが大幅に 抑制できる。すなわち、当該フタロニトリル化合物は、 光記録媒体に適した反射率および記録感度などの光学特 性を有する置換基を持つフタロシアニン化合物を合成す るのに有用な原料である点で好ましいと言える。

【0046】特に好ましくは、置換基V、Wがフェノキ シ基の2,6位にあり、置換基Vが、2級以上のアルキ ル基が直接カルボニル基に結合したアルコキシカルボニ ル基であることが好ましい。特に該アルキル基がブロモ 原子を含有するアルキル基かまたは炭素数6以上のアル キル基であることが好ましい。これによって、光記録媒 体に好適な反射率、記録感度などの光学特性を有する置 換基を持つ新規なフタロシアニン化合物の合成に有用な 原料である点から特に好ましい。

【0047】上記一般式(1)において、フェノキシ基 に上記置換基V、Wを導入した残りの位置には、さらに 当該フタロニトリル化合物を用いて合成されるフタロシ

アニン化合物の溶解性を向上させたり吸収波長の制御の ために、新たな置換基を導入してもよい。これらの置換 基としては、ハロゲン原子、アルコキシ基が置換されて いてもよい炭素数1~20個の直鎖または分岐鎖のアル コキシからなるアルコキシカルボニル、置換されていて もよいアリールオキシカルボニル基、直鎖または分岐し ている置換されていてもよい炭素数1~12個のアルキ ル基、直鎖または分岐している炭素数1~12個のアル コキシ基、直鎖または分岐している炭素数1~20個の モノアルキルアミノ基、直鎖または分岐している炭素数 1~20個のジアルキルアミノ基、シクロヘキシル基、 置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていても よいアニリノ基またはニトロ基などが挙げられる。これ らのうち好ましくは、ハロゲン原子であり、特に好まし くは臭素原子である。

【0048】上記一般式(1)において、X、Yおよび Zは、水素原子またはフッ素原子を表わし、X、Yおよ びZのうち少なくとも一つはフッ素原子である。当該フ タロニトリル化合物を用いて合成されるフタロシアニン 化合物の溶解性が優れている点でX、YおよびZがいず れもフッ素原子であることが好ましい。

【0049】すなわち、上記一般式(1)において、上 記置換基V、Wがフェノキシ基の2、6位にあり、置換 基Vが、2級以上のアルキル基が直接カルボニル基に結 合したアルコキシカルボニル基であり、X、YおよびZ がいずれもフッ素原子であるものが好ましい。当該フタ ロニトリル化合物は、優れた溶解性および造膜性を有す るフタロシアニン化合物を合成することができる。さら に合成されたフタロシアニン化合物では、設計通りに有 用な置換基が導入されているので優れた反射率、記録感 度などの光学特性を発現できる。そのため、これを光記 録媒体、特に高速記録タイプのコンパクトディスクに対 応する光記録媒体に利用することができる。

【0050】なお、上記一般式(1)において、nは0 ~4の整数、好ましくは1~2の整数である。

【0051】本発明に用いるフタロニトリル化合物とし て、具体的に例えば下記の化合物が挙げられる。

【0052】化合物1;4-(2-フェニル-6-(2 -プロピル)フェノキシ)-3,5,6-トリフルオロ フタロニトリル:

[0053]

【化6】

【0054】化合物2;4-(2,6-ジフェニルフェ ノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0055】 【化7】

【0056】化合物3;4-(2,4-ジフェニルフェ ノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル: 【0057】

【化8】

【0058】化合物4;4-(2,4,6-トリフェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0059]

【化9】

【0060】化合物5;4-(2-(2-プロポキシ) カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0061] [化10]

【0062】化合物6;4-(2-(3-ペントキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0063】 【化11】

【0064】化合物7;4-(2-(3-ペントキシ) カルボニル-4-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0065]

【化12】

【0066】化合物8;4-(2-tertブトキシカルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0067]

【化13】

[0069]

【化14】

【0070】化合物10;4-(2-(6-ウンデカノ キシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3, 5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0071]

【化15】

【0072】化合物11:4-(2-(2,4-ジメチル-3-ペントキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル: 【0073】 【化16】

【0074】化合物12;4-(2-(2,6-ジメチル-4-ヘプトキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル: 【0075】 【化17】

【0076】化合物13;4-(2,4-ジ(2-プロボキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0077】 【化18】

【0078】化合物14;4-(2-(2-ブトキシ) カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0079】 【化19】

【0080】化合物15:4-(2-(2-ペントキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0081】 【化20】

【0082】化合物16;4-(2-(3-メトキシプロポキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル: 【0083】

【0084】化合物17;4-(2,4-ジ(2-メトキシエトキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ) -3,5,6-トリフルオロフタロニトリル: 【0085】 【化22】

$$\begin{array}{c} \text{CO}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3\\ \text{NC} \\ \text{F} \end{array}$$

【0086】化合物18;4-(2-エトキシ-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0087】 【化23】

【化21】

【0088】化合物19;4-(2,4-ジエトキシー6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0089]

【化24】

【0090】化合物20:4-(2-ベンジルオキシカルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0091】 【化25】

【0092】化合物21;4-(2-フェネチルオキシカルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0093】 【化26】

【0094】化合物22;4-(2-(2-テトラヒドロフルフリルオキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:【0095】 【化27】

【化28】

【0098】化合物24;4-(2,4-ジ(2-テトラヒドロフルフリルオキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0099】 【化29】

【0100】化合物25;4-(6-(プロモフェニル)-2-イソプロポキシカルボニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル: 【0101】 【化30】

【0102】化合物26;4-(プロモ-2-4)プロポキシカルボニル-6-7ェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0103]

【化31】

【0104】化合物27;4-(6-(4-クロロフェニル)-2-イソプロボキシカルボニルフェノキシ))-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル: 【0105】 【化32】

【0106】化合物28;4-(4-フルオロ-2-(2-メトキシエトキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0107]

【化33】

【0108】化合物29; 4-(6-(4-プロモメチルフェニル)-2-(2-テトラヒドロフルフリルオキシ)カルボニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0109]

【化34】

【0110】化合物30:4-(6-(4-)プロモメトキシフェニル) -2-4ソプロポキシカルボニルフェノキシ) -3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:【0111】

【0112】化合物31:4-(2-(2-メトキシエトキシ) カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0113】 【化36】

【化35】

【0114】化合物32:4,5-ビス(2-イソプロポキシカルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,6-ジフルオロフタロニトリル:

【0115】 【化37】

【0116】化合物33;4,5-ビス(2-tert -ブトキシカルボニルー6-フェニルフェノキシ)-3,6-ジフルオロフタロニトリル:

【0117】 【化38】

【0118】化合物34;4-(4-(2-ブロモエトキシ)カルボニル-2-フェニルフェノキシ)-3, 5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0119]

【化39】

【0120】化合物35;4-(2-(2-プロモエトキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3, 5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0121]

【化40】

【0122】化合物36;4-(2-(6-ブロモヘキ

シルオキシ) カルボニルー6-7ェニルフェノキシ) -3, 5, 6-トリフルオロフタロニトリル:

[0123]

【化41】

【0124】化合物37;4-(2,4-5)(6-70)モヘキシルオキシカルボニル)-6-7ェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0125]

【化42】

NC 
$$F$$
  $CO_2$   $(CH_2)_6Br$   $F$   $CO_2$   $(CH_2)_6Br$ 

【0126】化合物38;4-(2-(2-ブロモエチル)-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0127】 【化43】

【0128】化合物39:4-(4-(2-)70モエトキシ)-2-イソプロポキシカルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3, 5, 6-トリフルオロフタロニトリル:

【0129】 【化44】

【 0 1 3 0 】化合物 4 0 ; 4 - (2 - (2 - ブロモエトキシ) - 6 - フェニルフェノキシ) - 3 , 5 , 6 - トリフルオロフタロニトリル :

【0131】 【化45】

【0132】化合物41:4-(2-(2-)) ではまた キシ)カルボニルー6-フェニルフェノキシ)-3, 5, 6-トリフルオロフタロニトリル:

[0133]

【化46】

【0134】化合物42; 4-(2-(1-プロモ-2- プロポキシカルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0135]

【化47】

【0136】化合物43:4-(2-(1-ブロモ-1-プロポキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3.5,6-トリフルオロフタロニトリル:

[0137]

【化48】

【0138】化合物44;4-(2-(1,3-ジブロモ-2-プロポキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル: 【0139】

【化49】

【0140】化合物45:4-(2-(1,4-ジブロモ-2-ブトキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリル:

【0141】 【化50】

CO<sub>2</sub>CH (CH<sub>2</sub>Br) CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Br

【0142】化合物46;4,5-ビス(4-(6-ブロモヘキシル)-2-フェニルフェノキシ)-3,6-ジフルオロフタロニトリル:

【0143】 【化51】

$$\begin{array}{c|c} & & & & \\ & & & \\ NC & & & \\ & & & \\ NC & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & \\ & & & \\ & & & \\ & &$$

【0144】化合物47;4,5ービス(2ー(2ーブロモエトキシカルボニル)-6ーフェニルフェノキシ)-(2ーエトキシカルボニルー6ーフェニルフェノキシ)-3,6-ジフルオロフタロニトリル:【0145】

【化52】

 $F = CN \qquad V_{n} \qquad V_{$ 

【0152】また、上記合成式において、原料のフェノール化合物を2倍量用いることによって、下記一般式

【0146】化合物48;4,5-ビス(2-(2,3-ジブロモ-1-プロボキシ)カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,6-ジフルオロフタロニトリル:【0147】 【化53】

【0148】次に、本発明のフタロニトリル化合物の製造方法は、置換基を有していてもよいアリール基で置換されているフェノール化合物と少なくとも一つのハロゲン原子で置換されているフタロニトリル化合物を反応させることを特徴とするものである。

【0149】以下に、本発明の新規フタロニトリル化合物の製造方法について詳細に明記する。

【0150】一般式(1)に示すフタロニトリル化合物を例にとれば、下記式(2)にしたがって合成できる。【0151】

【化54】

(3) に示すフタロニトリル化合物を合成できる。 【0153】 【化55】

【0154】本発明の新規フタロニトリル化合物の製造 方法において、上記置換基を有していてもよいアリール 基で置換されているフェノール化合物と少なくとも一つ のハロゲン原子で置換されているフタロニトリル化合物 との反応は、無溶媒中でも行えるが、有機溶媒を使用し て行うのが好ましい。有機溶媒は、出発原料と反応性の ない不活性な溶媒であればいずれもよく、例えば、ベン ゼン、トルエン、キシレン、ニトロベンゼン、モノクロ ロベンゼン、ジクロロベンゼン、トリクロロベンゼン、 1-クロロナフタレン、1-メチルナフタレン、エチレ ングリコール、アセトニトリル、ベンゾニトリル、ピリ ジン、N, N-ジメチルホルムアミド、N-メチル-2 ーピロリジノン、N, N-ジメチルアセトフェノン、ト リエチルアミン、トリーn-ブチルアミン、ジメチルス ルホキシド、スルホランなどを用いることができ、好ま しくは、アセトニトリル、ベンゾニトリルである。

【0155】また、本発明では、反応の進行を促進するために触媒を共存させることができる。このような触媒としては、例えば、トリエチルアミン、トリーnーオクチルアミンなどの3級アミン化合物、KOH、NaOH、 $K_2CO_3$ 、 $Na_2CO_3$ 、KF、NaFなどのアルカリ金属化合物類が挙げられるが、好ましくはKFである。KFは少なくとも一つのハロゲン原子で置換されているフタロニトリル化合物に対して不活性なため、副反応がおこりにくいので好ましい。

【0156】本発明では、有機溶媒100部(以下、重量部を表す。)に対して、置換基を有していてもよいアリール基で置換されているフェノール化合物を2~40部、好ましくは5~20部の範囲、少なくとも一つのハ

(3)

ロゲン原子で置換されているフタロニトリル化合物を置換基を有していてもよいアリール基で置換されているフェノール化合物1モルに対して1~2モル、好ましくは1.1~1.5モルの範囲で仕込んで、反応温度30~250℃、好ましくは50~200℃の範囲で反応させる。また、触媒を共存させる場合には、触媒を置換基を有していてもよいアリール基で置換されているフェノール化合物1モルに対して0.1~8モル、好ましくは0.5~4モルの範囲で仕込んで反応させる。

## [0157]

【実施例】以下、本発明を実施例により具体的に説明する。

#### 【0158】実施例1

例示化合物 1 1: 4 - (2 - (2, 4 - ジメチル-3 - ペントキシ)カルボニルー6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリルの製造2-(2,4-ジメチル-3-ペントキシ)カルボニルー6-フェニルフェノール3.12g(0.01モル)、フッ化カリウム1.74g(0.03モル)、テトラフルオロフタロニトリル2.00g(0.01モル)およびアセトニトリル20m1を100m1四つロフラスコに仕込み、還流下4時間反応させた。反応終了後、フッ化カリウムを戸別しアセトニトリルを留去することにより目的物の淡黄色ケーキ4.04gを得た(収率82%)。得られた目的物の物性は、下記表1に示す通りである。

[0159]

【表1】

質量スペクトル	M <sup>+</sup> = 4 9 2					
元素分析值	Н	С	N	F		
理論值	4.71	68.29	5.69	11.57		
分析值	4.67	68.41	5.66	11.54		

## 【0160】実施例2

例示化合物5:4-(2-(2-プロポキシ) カルボニル-6-フェニルフェノキシ) -3,5,6-トリフルオロフタロニトリルの製造

2-(2-プロポキシ) カルボニル-6-フェニルフェ ノール2.56g(0.01モル)、フッ化カリウム 1.74g(0.03モル)、テトラフルオロフタロニトリル2.00g(0.01モル) およびアセトニトリ

ル20mlを100ml四つロフラスコに仕込み、還流下4時間反応させた。反応終了後、フッ化カリウムを沪別しアセトニトリルを留去することにより目的物の淡黄色ケーキ3.80gを得た(収率87%)。得られた目的物の物性は、下記表2に示す通りである。

[0161]

【表2】

質量スペクトル	M* = 4 3 6				
元素分析值	Н	С	N	F	
理論値	3.46	66.06	6.42	13.06	
分析值	3.51	66.59	6.32	13.17	

## 【0162】実施例3

例示化合物 44:4-(2-(1,3-)) ロボキシ)カルボニル -6- フェニルフェノキシ) -3, 5, 6- トリフルオロフタロニトリルの製造 2-(1,3-) ブロモー2- プロボキシ)カルボニルー6- フェニルフェノール4.14g(0.01 モル)、フッ化カリウム1.74g(0.03 モル)、テトラフルオロフタロニトリル2.00g(0.01 モ

ル)およびアセトニトリル20mlを100ml四つ口フラスコに仕込み、還流下4時間反応させた。反応終了後、フッ化カリウムを沪別しアセトニトリルを留去することにより目的物の淡黄色ケーキ5.05gを得た(収率85%)。得られた目的物の物性は、下記表3に示す通りである。

[0163]

【表3】

質量スペクトル	M <sup>+</sup> =594					
元素分析值	Н	С	N	F	Br	
理論値	2.21	48.51	4.71	9.59	26.90	
分析值	2.31	47.93	4.67	9.52	26.74	

## 【0164】実施例4

例示化合物 10:4-(2-(6-ウンデカノキシ) カルボニル-6-フェニルフェノキシ)-3,5,6-トリフルオロフタロニトリルの製造

2-(6-ウンデカノキシ)カルボニル-6-フェニルフェノール3.69g(0.01モル)、フッ化カリウム1.74g(0.03モル)、テトラフルオロフタロニトリル2.00g(0.01モル)およびアセトニト

リル20mlを100ml四つロフラスコに仕込み、還流下4時間反応させた。反応終了後、フッ化カリウムを 沪別しアセトニトリルを留去することにより目的物の淡 黄色ケーキ4.28gを得た(収率78%)。得られた 目的物の物性は、下記表4に示す通りである。

[0165]

【表4】

質量スペクトル	M <sup>+</sup> = 5 4 8				
元素分折值	Н	С	N	F	
理論値	5.70	70.06	5. 11	10.39	
分析值	5.62	70.13	5. 21	10.26	

## [0166]

【発明の効果】本発明の新規なフタロニトリル化合物は、光記録媒体に用いられるフタロシアニン化合物の原料として、光記録媒体に必要な特性を有するように分子設計されてなるものである。特にコンパクトディスク対応の光記録媒体に用いられるフタロシアニン化合物の原料として、それらに必要な特性である溶解度、吸収波長、感度、反射率、耐光性、熱分解特性を有するように、こうした特性を発現し得る1種ないし2種以上の置換基をフタロニトリル骨格のベンゼン核上の設計された位置に導入してなるものである。したがって、本発明の

新規化合物により、吸収特性、溶解性、耐光性、熱分解 特性および経済性に優れており、また650~900 n mの近赤外域に吸収を有する新規なフタロシアニン化合 物を設計通りに合成することができる。

【0167】本発明の製造方法によれば、フタロニトリル骨格のベンゼン核上の設計された位置に置換基を導入することが可能である。すなわち、本発明の製造方法によれば、用途に応じた化合物の分子設計が可能となり、その際、複雑な製造工程を経る必要もなく工業的に有利である。

				•
				i.
	4.			